UNIVERSIDAD SIMÓN BOLÍVAR
DEPARTAMENTO DE TERMODINÁMICA Y FENÓMENOS DE TRANSFERENCIA
MÉTODOS APROXIMADOS EN ING. QUÍMICA
TF-1313

ECUACIONES IMPLÍCITAS

Esta guía fue elaborada por:

Prof. Aurelio Stammitti Scarpone

con la ayuda de:

Br. María M. Camacho A.

ECUACIONES IMPLÍCITAS

Métodos con dos Puntos Iniciales

Este grupo de métodos buscan encerrar a la solución de una función dentro de un intervalo, el cual cada vez se hace más pequeño.

Para poder aplicar cualquiera de éstos métodos, debe verificarse previamente que se cumpla el Teorema de Bolzano.

- **Teorema del Valor Medio (Bolzano)**
  Sean $f(x)$ y $[a,b]$ un intervalo en donde $f(x)$ es continua; si $f(a)\cdot f(b) < 0$ entonces existe un valor $c \in (a,b)$ tal que $f(c)=0$. Pueden existir más de un valor c, es decir, la función $f(x)$ puede tener múltiples soluciones dentro del intervalo (a,b).

<u>Procedimiento general de cálculo</u>

1.- Escoger a y b.

2.- Evaluar $f(a)$ y $f(b)$.

3.- Verificar que $f(a)\cdot f(b)<0$, es decir, que signo de $f(a) \neq$ signo de $f(b)$.

4.- Calcular c con a, b, $f(a)$ y $f(b)$ (aquí es el paso en donde difieren los métodos).

5.- Evaluar $f(c)$.

6.- Si $|f(c)|$ < tolerancia → fin

Comentario:
Por lo general este valor es de 10^{-6} en el problema y de 10^{-3} en el parcial.

7.- $$\text{Si Signo de } f(c) = \text{Signo de } f(a) \Rightarrow \begin{cases} \leftarrow \text{asignación} \\ a_{nuevo} = c \\ b_{nuevo} = b \text{ (queda igual)} \end{cases}$$

$$\text{Si Signo de } f(c) = \text{Signo de } f(b) \Rightarrow \begin{cases} \leftarrow \text{asignación} \\ a_{nuevo} = a \text{ (queda igual)} \\ b_{nuevo} = c \end{cases}$$

y con a_{nuevo} y b_{nuevo} volver al punto 4.

1.1 Método de bisección

Busca el punto medio entre *a* y *b*, es decir:

$$c = \frac{a+b}{2} \qquad \textbf{(1)}$$

Ejemplo:

Resolver $f(x) = e^x - 2x^2 = 0$ con el intervalo (1,2) y una tolerancia de 0,01.

i	*a*	*f*(*a*)	*b*	*f*(*b*)	*c*	*f*(*c*)	Asignación
0	1	0,71828	2	-0,61094	1,5	-0,01831	$b_{nuevo} \leftarrow c$
1	1	0,71828	1,5	-0,01831	1,25	0,36534	$a_{nuevo} \leftarrow c$
2	1,25	0,36534	1,5	-0,01831	1,375	0,17383	$a_{nuevo} \leftarrow c$
3	1,375	0,17383	1,5	-0,01831	1,4375	0,077345	$a_{nuevo} \leftarrow c$
4	1,4375	0,077345	1,5	-0,01831	1,46875	0,029349	$a_{nuevo} \leftarrow c$
5	1,46875	0,029349	1,5	-0,01831	1,48438	$5{,}46\text{x}10^{-3}<0{,}01$	FIN

Observación: en este caso en particular, el punto *b* se mantuvo fijo en casi todas las iteraciones.

Esta es una desventaja del método, además de su lenta convergencia.

1.2 Método regula – falsi (interpolación lineal)

Traza una línea recta entre los puntos (*a*,*f*(*a*)) y (*b*,*f*(*b*)), es decir,

$$c = a - f(a).\left[\frac{b-a}{f(b)-f(a)}\right] \qquad \textbf{(2)}$$

Ejemplo:

Resolver $f(x) = e^x - 2x^2 = 0$ con el intervalo (1,2) y una tolerancia de 0,01.

i	***a***	***f*(*a*)**	***b***	***f*(*b*)**	***c***	***f*(*c*)**	**Asignación**
0	1	0,71828	2	-0,61094	1,54038	-0,07918	← $b_{nuevo}=c$
1	1	0,71828	1,54038	-0,07918	1,48673	$1{,}8777x10^{-3}$	← $a_{nuevo}=c$
2	1,48673	$1{,}877x10^{-3}$	1,54038	-0,07918	1,48797	$-1{,}2091x10^{-5}<10^{-3}$	FIN

¿Cómo se calculó *c*?

i = 0
$$c = 1 - 0{,}71828.\left[\frac{2-1}{(-0{,}61094)-0{,}71828}\right] = 1{,}54038$$

i = 1
$$c = 1 - 0{,}71828.\left[\frac{1{,}54038-1}{(-0{,}07918)-0{,}71828}\right] = 1{,}48673$$

i = 2
$$c = 1{,}48673 - 1{,}8777x10^{-3}.\left[\frac{1{,}54038-1{,}48673}{(-0{,}07918)-1{,}8777x10^{-3}}\right] = 1{,}48797$$

Observación: de este ejemplo puede verse que la velocidad de convergencia de este método es mucho mayor y que los valores de *a* y *b* van cambiando, evitando el estancamiento.

Comentario:
Una desventaja de este método es que no converge muy bien para funciones como log o exp cuando *a* y *b* están muy lejos.

RESUMEN

Las desventajas de los métodos con dos puntos iniciales son:

- Requieren de dos puntos iniciales.
- Deben cumplir con el Teorema del Valor Medio (Bolzano).
- Sólo de pueden resolver funciones que crucen el eje de las abscisas.

Tipo de funciones que no se pueden resolver:

$$y = x^2$$

$$y = sen(x) + 1$$

Métodos con un Punto Inicial

A diferencia de los métodos de dos puntos iniciales, esta familia de métodos solo requiere del conocimiento de un punto inicial, por lo tanto, NO están obligados a cumplir con el Teorema de Valor Medio; lo cual es útil para funciones que no presentan cambios de signo.

1.1 Método de punto fijo

Si se tiene una función $f(x) = 0$ y se quiere hallar el valor de x que haga cumplir dicha condición, se aplica la siguiente transformación:

$$f(x) = 0 \qquad \rightarrow \qquad x = g(x)$$

Es decir, se despeja una x de la función original; la desventaja es que NO todas las funciones pueden reescribirse de esa forma.

El procedimiento consiste en tomar el valor de x_{inicial} y evaluar la función $g(x)$; con ello se obtiene un nuevo valor de x; éste a su vez se reintroduce en la $g(x)$ nuevamente y se obtiene otro valor de x; se repite este proceso hasta que el valor de x no cambie en dos iteraciones consecutivas con una tolerancia especificada previamente.

En forma gráfica:

Proponer x_o (inicial) ; tol ≈ 10^{-6}

$$x_1 = g(x_0)$$

$$x_2 = g(x_1)$$

$$\vdots \qquad \vdots$$

$$x_{i+1} = g(x_i)$$

Se compara $|x_{i+1} - x_i| < \text{tol}$

Si es cierto, FIN del proceso,

Sino, seguir iterando.

Después de muchas iteraciones, el valor de x_{i+1} es la solución al problema original de $f(x) = 0$.

Ejemplo 1:

Hallar la solución de $e^x - 2x^2 = 0$, con $x_o = 1$

Aquí es posible despejar de dos formas:

1.- $e^x = 2x^2 \quad \rightarrow \quad x = \ln(2x^2)$

$\rightarrow \quad g(x) = \ln(2x^2)$

i	x_i	$x_{i+1} = g(x_i)$
0	1	0,69315
1	0,69315	-0,039871
2	-0,039871	-5,75106
3	-5,75106	4,19192
4	4,19192	3,55946
5	3,55946	3,232236
i+1	3,23236	← valor final

2.- $e^x = 2x^2 \quad \rightarrow \quad x^2 = \frac{1}{2}e^x \quad \rightarrow \quad x = \left(\frac{1}{2}e^x\right)^{1/2}$

$\rightarrow \quad g(x) = \left(\frac{1}{2}e^x\right)^{1/2}$

Ahora la pregunta es, darán el mismo resultado????

i	x_i	$x_{i+1}=g(x_i)$
0	1	1,16582
1	1,16582	1,26660
2	1,26660	1,33206
3	1,33206	1,37638
4	1,37638	1,40722
i+1	1,48796	← valor final

De los dos despejes se obtuvieron resultados diferentes, ahora ¿cuál es el correcto? La única forma de averiguarlo es graficando la función, si hacen eso, descubrirán que la respuesta correcta es esta última.

Entonces, como regla general, hay que despejar el término de mayor potencia dentro de la ecuación, si se puede.

Observación: esto NO garantiza resultados.

Ejemplo 2:

Resolver $x^3 + x^2 - 3x - 3 = 0$. Si se resuelve de forma analítica, las raíces son:

(-1; -1,732051; 1,732051)

En este caso también pueden hacerse distintos despejes.

1.- $x^3 = 3 + 3x - x^2 \quad \rightarrow \quad x = (3 + 3x - x^2)^{1/3}$

$\rightarrow \quad g(x) = (3 + 3x - x^2)^{1/3}$

x_0=1		
i	x_i	$x_{i+1}=g(x_i)$
0	1	1,70998
1	1,70998	1,73313
2	1,73313	1,73200
3	1,73200	1,73205
4	1,73205	–

x_0=2	
x_i	$x_{i+1}=g(x_i)$
2	1,70998
1,70998	1,73313
1,73313	1,73199
1,73199	1,73205
1,73205	–

x_0=5	
x_i	$x_{i+1}=g(x_i)$
5	0,956+1,657·i
–	–
–	–

Aquí puede verse que dependiendo del valor inicial, se puede converger a la solución o llegar a valores ilógicos, imaginarios en este caso.

2.- $3x = x^3 + x^2 - 3 \quad \rightarrow \quad x = \frac{1}{3}(x^3 + x^2 - 3)$

$$\rightarrow \quad g(x) = \frac{1}{3}(x^3 + x^2 - 3)$$

x_0=1		
i	x_i	$x_{i+1}=g(x_i)$
0	1	-0,33333
1	-0,33333	-0,975309
2	-0,975309	-0,99217
3	-0,99217	-0,997431
4	-0,997431	-0,99915
x	0,99999	–

x_0=2	
x_i	$x_{i+1}=g(x_i)$
2	3
3	11
11	483
483	37637291
–	–
–	–

Aquí puede verse que con el otro despeje del valor inicial, puede llegarse a otra de las soluciones de divergir.

Debe recordarse que todos estos métodos solamente son capaces de hallar una solución dado un valor inicial.

1.2 Método de Newton – Rapshon

Se basa en el principio del uso de la recta tangente a la función en un punto dado, por ello requiere del conocimiento de la derivada de la función.

Si se tiene $f(x) = 0$ la solución se consigue con la fórmula:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \qquad \textbf{(3)}$$

con: $f'(x_i) \neq 0$

Es un proceso iterativo, que partiendo de un valor inicial, calcula nuevamente la solución utilizando el valor y la derivada, aplicando la ecuación de la recta tangente y haciéndola cruzar por le eje x, obteniéndose así la ecuación (3).

El procedimiento iterativo se detiene cuando $|x_{i+1}–x_i|$ < tol; con tol establecido previamente.

Ejemplo 1:

Resolver $f(x) = e^x - 2x^2$; $x_{\text{inicial}} = 2$ pero ahora $f'(x) = e^x - 4x$

Evaluando:

i	x_i	$f(x_i)$	$f'(x_i)$	x_{i+1}
0	2	-0,64094	-0,61094	1
1	1	0,71828	-1,28172	1,5604
2	1,5604	-0,10897	-1,48087	1,48681
3	1,48681	$1{,}7558\text{x}10^{-3}$	-1,52428	1,48796
4	1,48796	$3{,}1472\text{x}10^{-6}$	–	–

Nótese aquí que el valor de $f(x_i)$ se va acercando a cero en cada iteración, lo que es de esperarse porque se busca que $f(x) = 0$.

Es necesario verificar siempre esto puesto que el método podría acercarse a un mínimo o un máximo si ocurre que $f'(x_i) = 0$.

Ejemplo 2:

Resolver $f(x) = x^3 + x^2 - 3x - 3$ con $x_{\text{inicial}} = 1$ pero ahora $f'(x) = 3x^2 + 2x - 3$

i	x_i	$f(x_i)$	$f'(x_i)$	x_{i+1}
0	1	-4	2	3
1	3	24	30	2,2
2	2,2	5,888	15,92	1,83015
3	1,83015	0,98899	10,70865	1,7378
5	1,73207	$1{,}81641\text{x}10^{-4}$	-	-

Nótese que aquí también hablamos de $f(x_i)$ tiende a cero en las iteraciones. Obsérvese también que $f'(x_i) \neq 0$ en todo momento, lo que es fundamental para el método.

Recordar también que la convergencia del método está asegurado sólo cuando:

$$\left| \frac{f''(x)}{f'(x)} \right| < \frac{1}{2} \tag{4}$$